

# 実数値染色体における遺伝子座間の独立性に関する 進化アルゴリズムの挙動解析

野 村 竜 也<sup>†</sup>

実数値染色体を用いた進化アルゴリズムの挙動解析の手法として、Euclid 空間における個体染色体の分布関数により集団の状態を表現し、一連の遺伝的操作による分布関数の変化を数学的に記述する手法がすでに提案されている。本稿ではこの解析的表現に基づいて、個体染色体集団において特定の遺伝子座間に独立性が存在する場合にこの独立性が世代交替を通じて保持されるための評価関数および遺伝的操作の十分条件のいくつかを明らかにする。さらにこの特殊な場合として、評価関数および個体分布関数が Gaussian の場合での平均と分散の変化方程式を具体的に与え、この方程式に基づき平均と分散の収束値を計算する。

## Behavior Analysis of Evolutionary Algorithms for Independency between Loci on Real-valued Chromosomes

TATSUYA NOMURA<sup>†</sup>

One of proposed methods for behavior analysis of evolutionary algorithms using real-valued chromosomes is representing the state of a population as a distribution function of individual chromosomes in an Euclidean space and mathematically describing the change of the function through genetic operations. Based on this analytical framework, this paper clarifies some sufficient conditions for fitness functions and genetic operations that independences between loci in a population is maintained through generation alternation. Furthermore, we provide concrete equations of mean values and variances of the chromosomes through generation alternation and calculate their convergence values when the fitness function and distribution function of the chromosomes are both independent Gaussian, which is a special case of the above conditions.

### 1. はじめに

進化アルゴリズム (Evolutionary Algorithms: EAs) の世代交替を通じての挙動の解析に関する実験的・理論的研究が近年数多く報告されており、理論的な結果の大多数は Simple GA を含む離散値染色体を用いる EA に関するものである<sup>1)~8)</sup>。一方で、実数値染色体を用いる EA に関する結果もいくつか存在する。たとえば、 $Q_i$  は無限の集団サイズの仮定の下で、一様交叉を含む遺伝的操作の特徴を導出しており、その解析の対象は、無限集団サイズでの個体染色体の分布関数が遺伝的操作によってどのように変化するかである<sup>9),10)</sup>。また、Rudolph は有限 Markov 過程の状態遷移行列の一般化概念である Markov Kernel を用いて、ユークリッド空間に限らない一般空間上での

遺伝子と有限集団サイズの仮定の下での EA の収束条件を導出している<sup>11)</sup>。我々もまた、実数値染色体を用いる EA、特に交配の特性に焦点を当て、 $Q_i$  ら<sup>9)</sup>と同じ無限集団サイズの仮定の下で、交配による個体染色体の分布関数の変化に関する結果を得ている<sup>12)~14)</sup>。

本稿では、上記の無限集団サイズでの個体染色体分布関数の変化による実数値 EA の解析手法に焦点を当て、2 章において  $Q_i$  ら<sup>9)</sup>の選択と突然変異に関する結果と我々の交配に関する結果<sup>13),14)</sup>を各々紹介したうえで、3 章においてそれらを統合した EA のダイナミクスを導出する。特に、本稿では特定の遺伝子座群の上の確率変数とそれ以外の遺伝子座群の上の変数との間に統計的独立性が存在する場合の EA の挙動に関して、 $Q_i$  ら<sup>9),10)</sup>の結果と我々の過去の結果を組み合わせることで得られた結果を与える。

<sup>†</sup> 阪南大学経営情報学部

Faculty of Management Information, Hannan University

## 2. 無限集団サイズの実数値 EA における遺伝的操作の効果

本章では、実数値 EA における集団の状態を染色体分布関数で記述し、分布関数の変化により遺伝的操作の影響を解析する既存の手法について説明する。

### 2.1 選択と突然変異の効果

本節では、Qi ら<sup>9)</sup>の結果を紹介する。

Qi らの定式化では、固定長  $m$  の実数値染色体を持つ個体は、 $m$  次元ユークリッド空間  $R^m$  上の確率変数  $X = (X_1, \dots, X_m)$  として表現される。今、 $p^{(k)} : R^m \rightarrow R$  を第  $k$  世代の集団における染色体の分布関数、 $q^{(k)}$  を分布  $p^{(k)}$  の集団に対してルーレット選択を行った後の染色体の分布関数とする。ここでは、交配は行わないとし、第  $(k+1)$  世代の集団における染色体の分布関数  $p^{(k+1)}$  は分布  $q^{(k)}$  の下で突然変異を行った結果として得られるものとする。

Qi ら<sup>9)</sup>ではより一般的な突然変異を考慮しているが、典型的な場合として以下の形の独立加法ノイズによるものを考えている。本稿でもこの場合を取り扱う。

$$\begin{aligned} \text{For } X &= (X_1, \dots, X_m) \in R^m \\ X'_i &= X_i + W_i^{(k)} \quad (i = 1, \dots, m) \\ X' &= (X'_1, \dots, X'_m) \in R^m \end{aligned} \quad (1)$$

ここで、 $W_i^{(k)}$  ( $i = 1, \dots, m$ ) は互いに独立な平均 0 の確率変数で、その確率密度関数  $w^{(k)} : R^m \rightarrow R$  は条件  $\sup_{x \in R^m} w^{(k)}(x) < \infty$  を満たすものとする。インデックス  $k$  は、一般的に加法ノイズの確率密度関数が世代を通じて一定とは限らないことを意味している。

さらに、 $f : R^m \rightarrow R$  を適応度関数とし、以下の条件を満たしていると仮定する。

- (1)  $f$  はたかだか有限個の最適値を持つ；
- (2)  $0 < \min_{x \in R^m} f(x) \leq f(x) \leq \max_{x \in R^m} f(x) < \infty, \forall x \in R^m$ ；
- (3)  $f$  の不連続点は有限個である。

以上の仮定の下で、選択と突然変異での EA による染色体の分布関数の変化は以下のように記述される (文献 9)、定理 1。なお、オリジナルの定理では  $f$  の定義域および以下の式の積分範囲は  $\mathcal{F} \subseteq R^m$  となっているが、本稿では  $\mathcal{F} = R^m$  とする)。

$$q^{(k)}(x) = \frac{f(x)p^{(k)}(x)}{\int_{R^m} f(x)p^{(k)}(x)dx} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} p^{(k+1)}(x) &= (q^{(k)} * w^{(k)})(x) \\ &= \int_{R^m} q^{(k)}(y)w^{(k)}(x-y)dy \end{aligned} \quad (3)$$

$$= \frac{\int_{R^m} f(y)p^{(k)}(y)w^{(k)}(x-y)dy}{\int_{R^m} f(x)p^{(k)}(x)dx}$$

また、この定理の特殊な場合として、ルーレット選択のみの EA、つまり

$$p^{(k+1)}(x) = \frac{f(x)p^{(k)}(x)}{\int_{R^m} f(x)p^{(k)}(x)dx}$$

の場合、適応度関数  $f$  が有界部分集合の上で定義されていて、唯一の最適点  $x^*$  を持ち、この  $x^*$  が単連結な近傍を持っていてその上で  $f$  が連続であるという条件の下で、初期分布関数  $p^{(0)}$  が  $x^*$  において 0 でなければ  $\lim_{k \rightarrow \infty} p^{(k)}(x) = \delta(x - x^*)$  ( $\delta(\cdot)$  は Dirac の Delta 関数)、つまり染色体集団は最適点に収束する (文献 9)、定理 2)。

また、式 (2)、(3) で表される EA に対し、適応度関数  $f$  の (複数存在する) 各最適点に対して  $f$  がその上で連続であるような単連結近傍が存在し、最適点の少なくとも 1 つにおいて初期分布  $p^{(0)}$  が 0 でないという条件の下で、平均適応度  $E(f, p^{(k)}) = \int f(x)p^{(k)}(x)dx$  が単調非減少となり最大適応度に収束するような突然変異確率密度関数列  $\{w^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$  が存在する (文献 9)、定理 3)。

さらに、適応度関数  $f$  が以下の形の Quadratic なもの

$$\begin{aligned} f(x) &= \exp \left[ -\frac{1}{2}(x - x^*)Q(x - x^*)^T \right] \\ x^* &= (x_1^*, \dots, x_m^*) \in R^m : \text{唯一の最適点} \\ Q &: m \times m \text{ 正値定対称行列} \\ & \quad ({}^T : \text{転置作用素}) \end{aligned} \quad (4)$$

であり、第 0 世代における染色体分布関数が Gaussian、つまり

$$\begin{aligned} p^{(0)}(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{m/2} |\Sigma^{(0)}|^{1/2}} \times \\ & \quad \exp \left[ -\frac{1}{2}(x - \mu^{(0)})\Sigma^{(0)-1}(x - \mu^{(0)})^T \right] \\ \mu^{(0)} &= (\mu_1^{(0)}, \dots, \mu_m^{(0)}) : \text{平均値ベクトル} \\ \Sigma^{(0)} &= \left( (\Sigma^{(0)})_{ij} \right) : \text{共分散行列} \end{aligned} \quad (5)$$

であり、突然変異が各世代  $k$  において分散  $\sigma_w^{(k)} = (\sigma_{w1}^{(k)}, \dots, \sigma_{wm}^{(k)})$  を持つ独立 Gauss 分布であるならば、任意の世代  $k$  において染色体分布は Gaussian であり、その平均値ベクトル  $\mu^{(k)} = (\mu_1^{(k)}, \dots, \mu_m^{(k)})$  と共分散行列  $\Sigma^{(k)} = \left( (\Sigma^{(k)})_{ij} \right)$  は以下の漸化式で与えられる (文献 9)、定理 4)。

$$\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} - (\mu^{(k)} - x^*) Q \left( Q + \Sigma^{(k)-1} \right)^{-1} \quad (6)$$

$$\Sigma^{(k+1)} = \left( Q + \Sigma^{(k)-1} \right)^{-1} + D(\sigma_w^{(k)}) \quad (7)$$

$$(k = 0, 1, \dots)$$

$$D(x_1, \dots, x_m) = \begin{pmatrix} x_1 & & \\ & \ddots & \\ & & x_m \end{pmatrix}$$

(for  $(x_1, \dots, x_m) \in R^m$ )

式 (6) は選択による平均ベクトルの変化を表しており、突然変異は平均ベクトルに影響を与えない。特に、項  $(\mu^{(k)} - x^*) Q$  は集団平均の点における適応度関数の勾配に対応しており、EA における集団平均の変化が近似的な Newton 法に沿うものであることを示している。また、式 (7) の第 1 項は選択による共分散の変化を、第 2 項はそれと独立した突然変異による影響を表している。

## 2.2 交配の効果

Qi ら<sup>10)</sup>は、上記の無限集団サイズによる定式化の下で、一様交叉による染色体分布関数の変化について解析を行い(文献 10)、定理 1)、一様交叉の繰返し適用により各遺伝子座間(染色体実数ベクトルの各座標上の確率変数)が互いに独立した状態に収束することを示している(文献 10)、定理 2)。我々は、この結果を拡張する形で、1 点交叉、多点交叉、一様交叉、平均値交叉<sup>15)</sup>、線形交叉<sup>16)</sup>、 $R^3$  オペレータ<sup>17)</sup>、BLX- $\alpha$ <sup>18)</sup>を含む一般的交配による染色体分布関数の変化について解析を行っている<sup>12)~14)</sup>。本節では文献 14)を基にこれらの結果を紹介する。

Qi らの定式化と同様に、ここでも固定長  $m$  の実数値染色体を  $m$  次元ユークリッド空間  $R^m$  上の確率変数  $X = (X_1, \dots, X_m)$  として表現する。また、2 つの親個体から 2 つの子個体を生成する、以下の形式で記述される交配のみを考えるとする。

$$X = (X_1, \dots, X_m), Y = (Y_1, \dots, Y_m) \in R^m,$$

$$X'_i = a_i X_i + (1 - a_i) Y_i, \quad (8)$$

$$Y'_i = (1 - b_i) X_i + b_i Y_i \quad (i = 1, \dots, m),$$

$$X' = (X'_1, \dots, X'_m), Y' = (Y'_1, \dots, Y'_m) \in R^m.$$

ここで、 $X$  と  $Y$  は親個体、 $X'$  と  $Y'$  は子個体である。交配パラメータ  $(a, b) = (a_1, \dots, a_m, b_1, \dots, b_m)$  は確率密度関数  $s(a, b)$  を持つ  $R^{2m}$  上の確率変数であり、 $(a, b)$  と  $(X, Y)$  は独立であると仮定する。また、 $s(a, b)$  に関して以下の条件を仮定する。

$$s(a, b) = s(b, a) \quad \text{for } \forall (a, b) \in R^{2m}, \quad (9)$$

$$\det C(a_i, b_i) = a_i + b_i - 1 \neq 0 \quad (10)$$

$$\text{for } \forall (a, b) \text{ s.t., } s(a, b) \neq 0$$

$$(i = 1, \dots, m)$$

$$\left( C(x, y) = \begin{pmatrix} x & 1-y \\ 1-x & y \end{pmatrix}, (x, y) \in R^2 \right).$$

上記の代表的交配方式は、すべて式 (8)、(9)、(10) の特殊な場合として定式化できる。

今、交配前の染色体分布関数を  $p: R^m \rightarrow R$ 、交配後の分布関数を  $q: R^m \rightarrow R$  とすると、上記の交配により以下の関係が与えられる。

$$q(x) = \int_{\Lambda} \frac{s(a, b)}{|\det F(a, b)|} \times \quad (11)$$

$$\left\{ \int_{R^m} p(xD(a') + y(I - D(a'))) \right.$$

$$p(x(I - D(b')) + yD(b')) dy \Big\} dadb$$

$I: m \times m$  単位行列、

$$F(x, y) = \begin{pmatrix} D(x) & I - D(y) \\ I - D(x) & D(y) \end{pmatrix}$$

for  $(x, y) \in R^{2m}$

$$\Lambda = \{(a, b) \in R^{2m}; s(a, b) \neq 0\}$$

$$(a', b') = (a'_1, \dots, a'_m, b'_1, \dots, b'_m) \in R^{2m}$$

$$a'_i = \frac{b_i}{a_i + b_i - 1}, b'_i = \frac{a_i}{a_i + b_i - 1}$$

$$(i = 1, \dots, m)$$

この結果を元に、上記の形で表される交配が染色体分布の平均値を変えないこと、および交配前の各遺伝子座間の共分散  $V(x_i, x_j, p)$  と交配後の共分散  $V(x_i, x_j, q)$  との間に以下の関係が成立することが示される。

$$V(x_i, x_j, p) = PC_{ij} V(x_i, x_j, q) \quad (12)$$

$$PC_{ij} = E(2a_i a_j - a_i - a_j) + 1$$

( $E(\cdot)$  は期待値)

各交配方式によって共分散増減比  $PC_{ij}$  は当然異なり、平均値交叉は集団分布を縮小の方向に、線形交叉や BLX- $\alpha$  は ( $\alpha$  の値によって) 集団分布を拡大方向に発展させる。また、1 点交叉と多点交叉は、一様交叉と同様に各遺伝子座間が互いに独立した状態に集団を収束させることが示される。

## 3. 無限集団サイズの実数値 EA における世代交替

2.1 節と 2.2 節の結果を合わせるにより、無限集団サイズでの実数値 EA の世代交替における染色体分布関数の変化を表すことが可能である。

適応度関数  $f$  に関して 2.1 節と同様の仮定を置き、

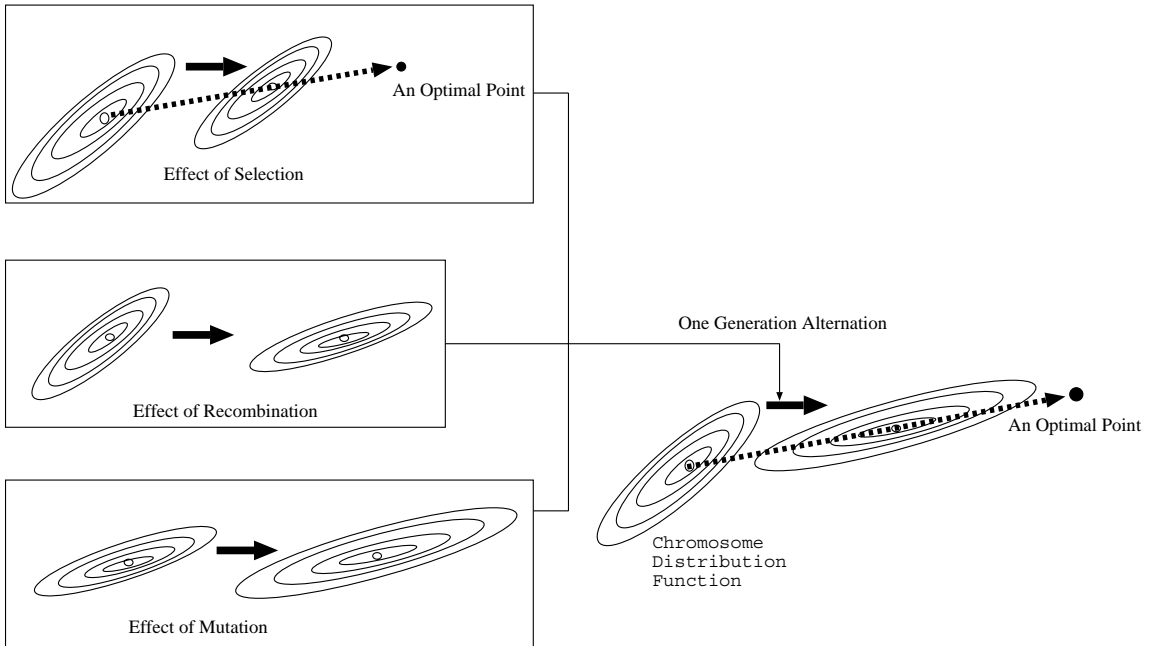


図1 染色体分布の変化における遺伝的操作の影響

Fig. 1 Influence of genetic operations on change of the chromosome distribution.

ルーレット選択, 2.2 節の条件での交配, 2.1 節の条件での加法ノイズ突然変異の順に 1 世代での遺伝的操作を行うとする。今,  $p^{(k)} : R^m \rightarrow R$  を第  $k$  世代の集団における染色体の分布関数,  $q^{(k)}$  を分布  $p^{(k)}$  の集団に対してルーレット選択を行った後の染色体の分布関数,  $v^{(k)}$  を分布  $q^{(k)}$  の集団に対して交配を行った後の染色体分布関数とすれば, 式 (2), (3), (11) により以下の 1 世代交替での染色体分布関数の変化が得られる。

$$q^{(k)}(x) = \frac{f(x)p^{(k)}(x)}{\int_{R^m} f(x)p^{(k)}(x)dx} \quad (13)$$

$$v^{(k)}(x) = \int_{\Lambda} \frac{s(a, b)}{|\det F(a, b)|} \times \quad (14)$$

$$\left\{ \int_{R^m} q^{(k)}(xD(a') + y(I - D(a'))) \right. \\ \left. q^{(k)}(x(I - D(b')) + yD(b')) dy \right\} dadb$$

$$p^{(k+1)}(x) = \int_{R^m} v^{(k)}(y)w^{(k)}(x - y)dy \quad (15)$$

式 (13) は, 選択により染色体集団が最適値の方向に引き寄せられる効果に対応し, 式 (14) は交配による染色体集団の各遺伝子座間の相関への影響に対応し, 式 (15) は突然変異により染色体値集団が ( 遺伝子座間の相関に影響を与えずに ) 拡散する効果に対応する ( 図 1 参照 ) 。

上述の各遺伝的操作の効果を明確にするために, 今

後は以下の特殊な場合を考察する。

### 3.1 分離型適応度関数と独立遺伝子座に対する挙動

今, 以下の条件を仮定する。

仮定 1:  $f(x)$  は変数群  $\{x_{i_{11}}, \dots, x_{i_{1d_1}}\}, \{x_{i_{21}}, \dots, x_{i_{2d_2}}\}, \dots, \{x_{i_{L1}}, \dots, x_{i_{Ld_L}}\}$  に関して分離型 ( $2 \leq L \leq m, \sum_{j=1}^L d_j = m, d_j \geq 1, 1 \leq i_{j1} < \dots < i_{jd_j} \leq m (j = 1, \dots, L)$ ), つまり  $f(x_1, \dots, x_m) = \prod_{j=1}^L f_j(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}})$ ;

仮定 2: 第  $k$  世代における染色体の遺伝子座上の確率変数  $X_1, \dots, X_m$  に対して,  $\{X_{i_{11}}, \dots, X_{i_{1d_1}}\}, \{X_{i_{21}}, \dots, X_{i_{2d_2}}\}, \dots, \{X_{i_{L1}}, \dots, X_{i_{Ld_L}}\}$  は互いに独立, つまり  $p^{(k)}(x_1, \dots, x_m) = \prod_{j=1}^L p_j^{(k)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}})$  ( $p_j^{(k)}$  は第  $k$  世代における  $\{X_{i_{j1}}, \dots, X_{i_{jd_j}}\}$  の分布関数)。

#### 3.1.1 一般の場合

まず, 上記仮定 1, 2 と式 (13) から以下の式が得られる。

$$q^{(k)}(x_1, \dots, x_m) = \prod_{j=1}^L q_j^{(k)} \quad (16)$$

$$q_j^{(k)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}}) = \frac{f_j p_j^{(k)}}{\int f_j p_j^{(k)} dx_{i_{j1}} \dots x_{i_{jd_j}}}$$

$q_j^{(k)}$  がルーレット選択後の  $\{X_{i_{j1}}, \dots, X_{i_{jd_j}}\}$  の分布関数であることは明らかである。

次に, 第  $k$  世代において交配後も  $\{X_{i_{11}}, \dots,$

$X_{i_{1d_1}}, \{X_{i_{21}}, \dots, X_{i_{2d_2}}, \dots, \{X_{i_{L1}}, \dots, X_{i_{Ld_L}}\}$  が互いに独立, つまり  $v^{(k)}(x_1, \dots, x_m) = \prod_{j=1}^L v_j^{(k)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}})$  ( $v_j^{(k)}$  は第  $k$  世代において交配後の  $\{X_{i_{j1}}, \dots, X_{i_{jd_j}}\}$  の分布関数)であると仮定すれば, 式 (3) と突然変異に関する仮定  $w^{(k)}(x_1, \dots, x_m) = \prod_{i=1}^m w_i^{(k)}(x_i)$  より以下の式が得られる.

$$p^{(k+1)}(x) = \int \prod_{j=1}^L v_j^{(k)}(y_{i_{j1}}, \dots, y_{i_{jd_j}}) \prod_{i=1}^m w_i^{(k)}(x_i - y_i) dy_1 \cdots dy_m = \prod_{j=1}^L p_j^{(k+1)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}}) \quad (17)$$

$$p_j^{(k+1)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}}) = \int dy_{i_{j1}} \cdots dy_{i_{jd_j}} v_j^{(k)}(y_{i_{j1}}, \dots, y_{i_{jd_j}}) \left( \prod_{l=1}^{d_j} w_{i_{jl}}^{(k)}(x_{i_{jl}} - y_{i_{jl}}) \right)$$

したがって, 以下の事実が得られる.

**事実 1:** 仮定 1, 2 の下で, 遺伝子座上の確率変数群  $\{X_{i_{11}}, \dots, X_{i_{1d_1}}, \{X_{i_{21}}, \dots, X_{i_{2d_2}}, \dots, \{X_{i_{L1}}, \dots, X_{i_{Ld_L}}\}$  は第  $k$  世代でのルーレット選択後も互いに独立である.

**事実 2:** 第  $k$  世代の交配後の確率変数群  $\{X_{i_{11}}, \dots, X_{i_{1d_1}}, \{X_{i_{21}}, \dots, X_{i_{2d_2}}, \dots, \{X_{i_{L1}}, \dots, X_{i_{Ld_L}}\}$  が互いに独立ならば, 第  $k$  世代の突然変異後, つまり第  $(k+1)$  世代においてもこれらの変数群は互いに独立である.

**事実 3:** 仮定 1, 2 の下で, 交配が上記独立性を保存するならば, EA は第  $(k+1)$  世代においても仮定 2 の遺伝子座間の独立性を保存する.

しかし, 交配は一般的に仮定 1, 2 の独立性を保存するとは限らない. ただし, 式 (11), (16) から以下の式を得ることはできる.

$$v^{(k)}(x) = \int_{\Lambda} da db s(a, b) \times \prod_{j=1}^L h_j^{(k)}(x_{i_{j1}}, \dots, x_{i_{jd_j}}, a_{i_{j1}}, \dots, a_{i_{jd_j}}, b_{i_{j1}}, \dots, b_{i_{jd_j}}) \quad (18)$$

$$h_j^{(k)} = \frac{1}{\prod_{l=1}^{d_j} (a_{i_{jl}} + b_{i_{jl}} - 1)} \int dy_{i_{j1}} \cdots dy_{i_{jd_j}} \left\{ q_j^{(k)}(a'_{i_{j1}} x_{i_{j1}} + (1 - a'_{i_{j1}}) y_{i_{j1}}, \dots, (1 - b'_{i_{jd_j}}) x_{i_{jd_j}} + b'_{i_{jd_j}} y_{i_{jd_j}}) \right\}$$

$$\dots, a'_{i_{jd_j}} x_{i_{jd_j}} + (1 - a'_{i_{jd_j}}) y_{i_{jd_j}}) \times q_j^{(k)} \left( (1 - b'_{i_{j1}}) x_{i_{j1}} + b'_{i_{j1}} y_{i_{j1}}, \dots, (1 - b'_{i_{jd_j}}) x_{i_{jd_j}} + b'_{i_{jd_j}} y_{i_{jd_j}} \right) \Big\}$$

ゆえに,  $\{a_{i_{j1}}, \dots, a_{i_{jd_j}}, b_{i_{j1}}, \dots, b_{i_{jd_j}}\}$  ( $j = 1, \dots, L$ ) が互いに独立ならば,  $v^{(k)}$  は  $\{X_{i_{j1}}, \dots, X_{i_{jd_j}}\}$  ( $j = 1, \dots, L$ ) の分布関数の積となり, 交配は独立性を保存する. しかし, 一般的にはこれらの確率変数群は独立ではなく, 式 (18) からは交配が遺伝子座間の独立性を保存するかどうかは分からない.

### 3.1.2 1点, 多点, 一様交叉を用いる場合

本項では, 上記の仮定 1, 2 により強い条件を付加した場合の EA の特性を導出する.

まず, 仮定 1, 2 の下で  $L = m$  の場合, つまり以下の条件を仮定する.

**仮定 3:**  $f(x)$  は完全分離型, つまり  $f(x_1, \dots, x_m) = \prod_{i=1}^m f_i(x_i)$ ;

**仮定 4:** 第  $k$  世代において, すべての遺伝子座上の確率変数が互いに独立, つまり  $p^{(k)}(x_1, \dots, x_m) = \prod_{i=1}^m p_i^{(k)}(x_i)$  ( $p_i^{(k)}$  は  $X_i$  の分布関数).

上記仮定 3, 4 の下で, 3.1.1 項の結果から, ルーレット選択がこの独立性を保存することが以下の形で簡単に示される.

$$q^{(k)}(x) = \prod_{i=1}^m q_i^{(k)}(x_i) \quad (19)$$

$$q_i^{(k)}(x_i) = \frac{f_i(x_i) p_i(x_i)}{\int_R f_i(x_i) p_i(x_i) dx_i}$$

今, 交配として 1点, 多点, 一様交叉を用いるとする. これらの交配方式による染色体の分布関数の変化は, 以下の形で記述される<sup>13),14)</sup>.

1点交叉:

$$v^{(k)}(x) = \frac{r}{m-1} \sum_{k=1}^{m-1} \left\{ q_{(12 \dots k)}^{(k)}(x_1, \dots, x_k) q_{(k+1 \dots m)}^{(k)}(x_{k+1}, \dots, x_m) \right\} + (1-r) q^{(k)}(x) \quad (20)$$

$c$  点交叉 ( $c \geq 2$ ):

$$v^{(k)}(x) = \frac{r}{C_m} \times \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_c \leq m} \left\{ q_{(1 \dots i_1 i_2 + 1 \dots i_3 i_4 + 1 \dots)}^{(k)}(x_1, \dots, x_{i_1}, x_{i_2+1}, \dots, x_{i_3}, x_{i_4+1}, \dots) \times q_{(i_1+1 \dots i_2 i_3 + 1 \dots i_4 i_5 + 1 \dots)}^{(k)}(x_{i_1+1}, \dots, x_{i_2}, x_{i_3+1}, \dots, x_{i_4}, x_{i_5+1}, \dots) \right\} \quad (21)$$

$$+(1-r)q^{(k)}(x)$$

$$\left( C_m = \binom{m-1}{c} \right)$$

一様交叉：

$$v^{(k)}(x) = \sum_{k=0}^m r^k (1-r)^{m-k} \times \quad (22)$$

$$\sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq m} \left\{ q_{(i_1 \dots i_k)}^{(k)}(x_{i_1}, \dots, x_{i_k}) \times q_{(i_{k+1} \dots i_m)}^{(k)}(x_{i_{k+1}}, \dots, x_{i_m}) \right\}$$

$$= \sum_{k=0}^d \left[ r^k (1-r)^{m-k} + r^{m-k} (1-r)^k \right] \times$$

$$\sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq m} \left\{ q_{(i_1 \dots i_k)}^{(k)}(x_{i_1}, \dots, x_{i_k}) \times q_{(i_{k+1} \dots i_m)}^{(k)}(x_{i_{k+1}}, \dots, x_{i_m}) \right\}$$

$$\left( d = \begin{cases} \frac{m}{2} & (m \text{ が偶数の場合}) \\ \frac{m-1}{2} & (m \text{ が奇数の場合}) \end{cases} \right)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \{i_{k+1}, \dots, i_m\} = \\ \{1, \dots, m\} - \{i_1, \dots, i_k\}, \\ 1 \leq i_{k+1} < i_{k+2} < \dots < i_m \leq m \end{aligned} \right.$$

ここで、 $r$  は交配確率である。また、 $q_{(i_1, \dots, i_d)}^{(k)}(x_{i_1}, \dots, x_{i_d})$  は第  $k$  世代におけるルーレット選択後の  $i_1, \dots, i_d$  番目の遺伝子座上の確率変数の分布関数であり、以下の形で定義される。

$$q_{(i_1 \dots i_d)}^{(k)}(x_{i_1}, \dots, x_{i_d}) = \quad (23)$$

$$\int q^{(k)}(x) dx_{i_{d+1}} \dots dx_{i_m}$$

$$\left( \begin{aligned} \{i_{d+1}, \dots, i_m\} = \\ \{1, \dots, m\} - \{i_1, \dots, i_d\}, \\ 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_m \leq m \end{aligned} \right)$$

これら交配手法による分布関数の変化は、以下の一般的な形式にまとめることができる。

$$v^{(k)}(x) = \sum_{h=1}^m \sum_{\substack{j_1 < \dots < j_h \\ \{j_1, \dots, j_h\} \cup \{j_{h+1}, \dots, j_m\} = \{1, \dots, m\}}} \quad (24)$$

$$\left\{ r_{j_1, \dots, j_h} q_{(j_1 \dots j_h)}^{(k)}(x_{j_1}, \dots, x_{j_h}) q_{(j_{h+1} \dots j_m)}^{(k)}(x_{j_{h+1}}, \dots, x_{j_m}) \right\}$$

$$\left( \sum_{h=1}^{m-1} \sum_{\substack{j_1 < \dots < j_h \\ \{j_1, \dots, j_h\} \cup \{j_{h+1}, \dots, j_m\} = \{1, \dots, m\}}} r_{j_1, \dots, j_h} = 1 \right)$$

また、式 (19), (23) より以下の式を得ることができる。

$$q_{(j_1, \dots, j_h)}^{(k)}(x_{j_1}, \dots, x_{j_h}) \times q_{(j_{h+1}, \dots, j_m)}^{(k)}(x_{j_{h+1}}, \dots, x_{j_m})$$

$$= \prod_{l=1}^h q_{j_l}^{(k)}(x_{j_l}) \times \prod_{l=h+1}^m q_{j_l}^{(k)}(x_{j_l})$$

$$= \prod_{i=1}^m q_i^{(k)}(x_i) = q^{(k)}(x) \quad (25)$$

したがって、式 (24), (25) から  $v^{(k)} = q^{(k)}$  が導かれる。つまり、すべての遺伝子座上の確率変数が互いに独立ならば、1点、多点、一様交叉は染色体の分布を変えないことが導かれる。

さらに、3.1.1 項の結果から突然変異は上記独立性を保存することが、以下の形で簡単に示される。

$$p^{(k+1)}(x) = \prod_{i=1}^m p_i^{(k+1)}(x_i) \quad (26)$$

$$p_i^{(k+1)}(x_i) = \int v_i^{(k)}(x_i) w_i(x_i - y_i) dy_i$$

$$v_i^{(k)}(x_i) = q_i^{(k)}(x_i)$$

したがって、以下の事実が得られる。

事実 4: すべての遺伝子座上の確率変数が互いに独立ならば、1点、多点、一様交叉は染色体の分布を変えない。

事実 5: 仮定 3, 4 の下で、EA が交配として 1点、多点、一様交叉を用いるならば、仮定 4 の遺伝子座間の独立性は第  $(k+1)$  世代においても保存される。

### 3.2 染色体分布と適応度関数が Gaussian の場合の EA の挙動

本節では、以下の条件を仮定する。

仮定 5: 適応度関数  $f$  は式 (4) の形の Quadratic なもの。

仮定 6: 第 0 世代における染色体分布関数は式 (5) の形の Gaussian。

仮定 7: 2.1 章の突然変異は各世代  $k$  において分散  $\sigma_w^{(k)} = (\sigma_{w_1}^{(k)}, \dots, \sigma_{w_m}^{(k)})$  を持つ独立 Gauss 分布。

この証明において、適応度関数に関する仮定はまったく用いられていないことに注意。

### 3.2.1 一般の場合

上記の仮定 5, 6, 7 から, 2.1 節で紹介した  $Q_i$  らの結果である式 (6), (7) および 2.2 節で紹介した我々の結果 (12) を組み合わせることにより, 以下の事実が得られる.

**事実 6:** 仮定 5, 6, 7 の下で, 交配が染色体分布の Gauss 性を保存するならば, 任意の世代  $k$  において染色体の分布は Gaussian であり, その平均ベクトル  $\mu^{(k)}$  と共分散行列  $\Sigma^{(k)}$  は以下の関係を満たす.

$$\mu^{(k)} = \left[ x^* Q + \mu^{(k)} \Sigma^{(k)-1} \right] \Sigma'^{(k)} \quad (27)$$

$$\Sigma'^{(k)} = \left( Q + \Sigma^{(k)-1} \right)^{-1} \quad (28)$$

$$\mu''^{(k)} = \mu^{(k)} \quad (29)$$

$$\Sigma''^{(k)} = MM(PC, \Sigma'^{(k)}) \quad (30)$$

$$\mu^{(k+1)} = \mu''^{(k)} \quad (31)$$

$$\Sigma^{(k+1)} = \Sigma''^{(k)} + D(\sigma_w^{(k)}) \quad (32)$$

$$(k = 0, 1, \dots)$$

$$\left( \begin{array}{l} C = MM(A, B) \\ A, B, C : m \times m \text{ 行列} \\ (C)_{ij} = (A)_{ij} \times (B)_{ij} \\ PC : m \times m \text{ 行列} \\ (PC)_{ij} = E(2a_i a_j - a_i - a_j) + 1 \\ (E() : \text{期待値}) \end{array} \right)$$

ここで,  $\mu^{(k)}$  と  $\Sigma^{(k)}$  は第  $k$  世代におけるルーレット選択後の染色体の Gauss 分布の平均ベクトルと共分散行列,  $\mu''^{(k)}$  と  $\Sigma''^{(k)}$  は第  $k$  世代における交配後の染色体の Gauss 分布の平均ベクトルと共分散行列である.

**事実 6** の式は, 平均ベクトルと共分散行列に関する以下の形の式にまとめられる.

$$\mu^{(k+1)} = \mu^{(k)} - (\mu^{(k)} - x^*) Q \left( Q + \Sigma^{(k)-1} \right)^{-1} \quad (33)$$

$$\Sigma^{(k+1)} = MM \left( PC, \left( Q + \Sigma^{(k)-1} \right)^{-1} \right) + D(\sigma_w^{(k)}) \quad (34)$$

$$(k = 0, 1, \dots)$$

しかし, 交配は一般的に選択後の染色体分布の Gauss 性を保存するとは限らない. 次項では, 3.1.2 項と同様に, より特殊な場合を考察する.

### 3.2.2 1点, 多点, 一様交叉を用いる場合

本項では, 以下のより強い条件を仮定する.

**仮定 8:** 仮定 5 の条件に加えて,  $f(x)$  は完全分離型,

つまり  $Q$  は対角行列  $D(Q_1, \dots, Q_m)$  ( $Q_i \in R, Q_i > 0 (i = 1, \dots, m)$ ) である.

**仮定 9:** 仮定 6 の条件に加えて, すべての遺伝子座上の確率変数は互いに独立, つまり  $\Sigma^{(0)}$  は対角行列  $D(\Sigma_1^{(0)}, \dots, \Sigma_m^{(0)})$  である. ここで,  $\Sigma_i^{(0)}$  は第 0 世代における染色体の分布における  $i$  番目の変数の分散である ( $i = 1, \dots, m$ ).

このとき, 3.1.2 項の結果から, 1点, 多点, 一様交叉は染色体の分布を変えないことが明らかであり, 結果として染色体分布の Gauss 性も保存する. したがって, 以下の事実が得られる.

**事実 7:** 仮定 7, 8, 9 の下で, EA が交配として 1点, 多点, 一様交叉を用いるならば, 任意の世代  $k$  において染色体の分布は独立 Gaussian であり, 平均値  $\mu_i^{(k)}$  と分散  $\Sigma_i^{(k)}$  ( $i = 1, \dots, m$ ) は以下の関係を満たす.

$$\mu_i^{(k+1)} = \mu_i^{(k)} \quad (35)$$

$$\Sigma_i^{(k+1)} = \frac{\Sigma_i^{(k)} Q_i}{\Sigma_i^{(k)} Q_i + 1} \left( \mu_i^{(k)} - x_i^* \right) + \sigma_{wi}^{(k)} \quad (36)$$

$$(i = 1, \dots, m, k = 0, 1, \dots)$$

加えて,  $\sigma_{wi}^{(k)}$  が  $k$  に関する定数  $\sigma_{wi}$ , つまり突然変異が世代を通じて定常ならば, 平均値および分散は以下の形で収束する.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_i^{(k)} = x_i^* \quad (37)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Sigma_i^{(k)} = \Sigma_i \quad (38)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \sigma_{wi} + \sqrt{\sigma_{wi}^2 + \frac{4\sigma_{wi}}{Q_i}} \right\} > \sigma_{wi}$$

つまり, 染色体の極限分布は, 平均を適応度関数の最適値とし, 突然変異の分散よりも大きい分散を持つ独立 Gauss 分布である.

式 (37) は,

$$\mu_i^{(k+1)} - x_i^* = \frac{1}{\Sigma_i^{(k)} Q_i + 1} \left( \mu_i^{(k)} - x_i^* \right),$$

$$0 < \sigma_{wi} Q_i < \Sigma_i^{(k)} Q_i$$

となることから導かれる. また, 式 (38) は,  $\Sigma_i$  が以下の関数  $g(x)$  の唯一の正值の平衡点であり, 安定であることから導かれる.

$$g(x) = \frac{x}{Q_i x + 1} + \sigma_{wi},$$

$$\left( g'(x) = \frac{1}{(Q_i x + 1)^2}, 0 < g'(\Sigma_i) < 1 \right)$$

#### 4. おわりに

本稿では、2.1、2.2 節の形で定式化される実数値染色体 EA の挙動について、特定の遺伝子座群の間に統計的独立性が存在し、適応度関数が対応する変数に関して分離型である場合での解析を行った。まず、ルーレット選択と突然変異が独立性を保存すること（事実 1、2）、交配が独立性を保持するならば EA は 1 世代交替を通じて独立性を保存すること（事実 3）を示した。次に、すべての遺伝子座が独立で適応度関数が完全分離型であるという特殊な場合に関して、1 点、多点、一様交叉は染色体分布を変えないこと（事実 4）、これらの交配方式を用いた EA は独立性を保存すること（事実 5）を示した。さらに、適応度関数、染色体の初期分布、突然変異がいずれも Gaussian の場合、交配が染色体分布の Gauss 性を保存するならば EA は世代交替を通じて Gauss 性を保存することを示し、その平均と共分散の世代交替を通じての再帰方程式を導出した（事実 6）。最後に、適応度関数、初期分布が独立 Gaussian であるという特殊な場合に関して、1 点、多点、一様交叉を用いた EA は世代交替を通じて染色体分布の Gauss 性を保存すること、および平均と分散の世代交替を通じての再帰方程式とそれらの収束値を導出した（事実 7）。

しかし、本研究についてはいくつかの問題点がある。まず第 1 に、上記の結果は非常に限定された仮定（仮定 1~9）に基づいて導出されたものであり、実験的観点からは自明である可能性があることは否定できない。したがって、理論面から実験面への新たな寄与を発見するためには、これらの結果をより一般的な場合に拡張する必要がある。特に、本研究で用いている 2 親個体から 2 子個体を生成する交配方式の、染色体分布における遺伝子座間の独立性と Gaussian 特性に対する一般的性質がまだ得られていないことは問題であり、線形交叉や BLX- $\alpha$  などの他の交配手法が EA の過程においてどのような役割を持っているかを明らかにする必要がある。

また、本稿での染色体分布関数の変化方程式においては、交配の部分が式 (11) のように複雑な形式となり、直接解析を行うのは難しい。EA による世代交替のモデルを厳密に扱うためには、確率分布関数自体の差分方程式を体系的に扱う力学系理論を用いる必要がある。

また、無限集団サイズの仮定による理論は、実践場

面への適用において十分大きな集団を用いる EA でなければ挙動の予測の効果は期待できない。実際、我々の研究<sup>14)</sup>においても、集団サイズが小さい場合の EA の挙動は世代交替を重ねるにつれ理論の予測範囲を外れる傾向がある。そのためにも、Rudolph<sup>11)</sup>のような有限集団サイズの仮定での理論を発展させる必要がある。

#### 参考文献

- 1) Fogel, D.B.: *Evolving Artificial Intelligence*, Ph.D. Thesis, UCSD (1992).
- 2) Fogel, D.B.: *Asymptotic Convergence Properties of Genetic Algorithms and Evolutionary Programming: Analysis and Experiments*, *Cybernetics and Systems*, Vol.25, pp.389-407 (1994).
- 3) Booker, L.B.: *Recombination Distributions for Genetic Algorithms*, *FOGA-92, Proc. Workshop on the Foundations of Genetic Algorithms and Classifier Systems*, pp.29-44, Morgan Kaufmann (1992).
- 4) Nix, A.E. and Vose, M.D.: *Modeling genetic algorithms with Markov chains*, *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, Vol.5, pp.79-88 (1992).
- 5) Davis, T.E. and Principe, J.C.: *A Markov Chain Framework for the Simple Genetic Algorithm*, *Evolutionary Computation*, Vol.1, No.3, pp.269-288 (1993).
- 6) Suzuki, J.: *A Markov Chain Analysis on A Genetic Algorithm*, *Proc. ICGA '93*, pp.146-153 (1993).
- 7) Dawid, H.: *A Markov Chain Analysis of Genetic Algorithms with a State Dependent Fitness Function*, *Complex Systems*, Vol.8, pp.407-417 (1994).
- 8) Rudolph, G.: *Convergence Analysis of Canonical Genetic Algorithms*, *IEEE Trans. Neural Networks*, Vol.5, No.1, pp.96-101 (1994).
- 9) Qi, X. and Palmieri, F.: *Theoretical Analysis of Evolutionary Algorithms With an Infinite Population Size in Continuous Space Part I: Basic Properties of Selection and Mutation*, *IEEE Trans. Neural Networks*, Vol.5, No.1, pp.102-118 (1994).
- 10) Qi, X. and Palmieri, F.: *Theoretical Analysis of Evolutionary Algorithms With an Infinite Population Size in Continuous Space Part II: Analysis of the Diversification Role of Crossover*, *IEEE Trans. Neural Networks*, Vol.5, No.1, pp.120-129 (1994).
- 11) Rudolph, G.: *Convergence of Evolutionary*



- Algorithms in General Search Spaces, *Proc. ICEC'96*, Nagoya, pp.50–54 (1996).
- 12) Nomura, T.: An Analysis on Linear Crossover for Real Number Chromosomes in an Infinite Population Size, *Proc. International Conference on Evolutionary Computation (ICEC'97)*, pp.111–114 (1997).
- 13) Nomura, T.: An Analysis on Crossovers for Real Number Chromosomes in an Infinite Population Size, *Proc. International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-97)*, Vol.2, pp.936–941 (1997).
- 14) Nomura, T. and Shimohara, K.: An Analysis of Two-Parents Recombinations for Real-Valued Chromosomes in an Infinite Population, *Evolutionary Computation*, Vol.9, No.3, pp.283–308 (2001).
- 15) Davis, L.: *Handbook of Genetic Algorithms*, Van Nostrand Reinhold (1990). 嘉数侑昇ほか (共訳): 遺伝的アルゴリズムハンドブック, 森北出版 (1994).
- 16) Wright, A.H.: Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization, *Foundations of Genetic Algorithms*, Rawlins, G.J.E. (Ed.), pp.205–218, Morgan Kaufmann (1991).
- 17) Radcliffe, N.J.: Forma Analysis and Random Respectful Recombination, *Proc. ICGA'91*, pp.222–229 (1991).
- 18) Eshelman, L.J. and Shaffer, J.D.: Real-coded Genetic Algorithms and Interval Schemata, *Foundations of Genetic Algorithms II*, Whitley, D. (Ed.), pp.187–202, Morgan Kaufmann (1993).
- (平成 14 年 1 月 24 日受付)  
(平成 14 年 3 月 27 日再受付)  
(平成 14 年 4 月 8 日採録)



野村 竜也

昭和 39 年生。平成元年大阪大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了。同年シャープ(株)入社。平成 7 年から平成 10 年にかけて ATR 人間情報通信研究所出向。平成 12 年より阪南大学経営情報学部助教授。進化アルゴリズム, 生命システム論, 計算論的感情モデルの研究に従事。工学博士。日本神経回路学会, 日本ファジィ学会, 日本数学会, 数理社会学会, 日本グループ・ダイナミックス学会, 日本家族心理学会, International Society on Genetic and Evolutionary Computation, International Society for Artificial Life 各会員。